

中国科大在光催化PFASs低温脱氟领域取得重要进展

本报讯 中国科大合肥微尺度物质科学国家研究中心及化学系的研究团队发展了特氟龙等全氟及多氟烷基化合物的低温还原脱氟分解的变革性新方法。在该工作中，研究人员创制了扭曲促进电子得失的有机小分子超氧光还原剂KQGZ，并基于此发展了低温（40–60°C）催化还原特氟龙等全氟及多氟烷基化合物的完全脱氟新方法。相关研究成果于11月20日发表在《自然》上。



全氟和多氟烷基物质（PFAS）由于其分子内牢固的碳-氟键，具有独特的热稳定性、化学稳定性、疏水及疏油特性等，广泛应用于化工、电子、医疗设备、纺织机械、核工业等领域。但是碳-氟键的惰性也导致PFAS在自然环境或温和条件下难以降解。例如，特氟龙在260°C的温度下可以维持多年而不分解；而在500°C以上分解时则会释放出有毒气体。因此，PFAS被称为永久化学品。而被废弃于自然界中的PFAS，则引发了一系列的环境及健康问题。

围绕上述挑战，中国科大研究团队基于在特定光照具有超强还原性的原理，设计创制了超有机光还原剂（取名为KQGZ），首次实现了低温下特氟龙及小分子PFAS的完全脱氟矿化，将其高效回收为无机氟盐和碳资源。还原剂是能够提供电子的化学物质，而超有机还原剂则是能够把电子注入还原电位低于3伏特的化学键的电子供体。该研究不仅首次报道了高度扭曲的超有机光还原剂电子得失的促进作用，从而实现永久化学品的完全脱氟，也表

明了光还原剂的激发态氧化电位，与其还原能力并无直接关联，并非判断光催化剂还原能力的唯一标准；能否对特氟龙等PFAS进行完全还原脱氟可作为有机还原剂的还原能力标准。

超有机还原剂KQGZ是我国科学家独立设计创制、具有原创性的独特光还原催化剂，具有广阔的催化新裂变固-液以及液-液原子键的性能；在目前已经尝试的百余类反应中，均取得理想的结果。实验证明，其扭曲结构有效地促进了电子的得失，从而实现了超级还原作用，为新型超有机光还原剂的设计和研制提供了新的思路。

该论文的第一作者是中国科大博士生张浩，第二作者是从本科就参与此项研究的中国科大硕士生陈锦祥。通讯作者是中国科大康彦彪教授和南京工业大学曲剑教授。该项研究工作获得了国家重点研发项目催化专项（2021YFA1500100）、国家自然科学基金面上项目（22271268）和合肥微尺度物质科学国家研究中心的资助。（化学与材料科学学院 科研部）

中国科大研究团队借助AI破解催化领域重大科学难题

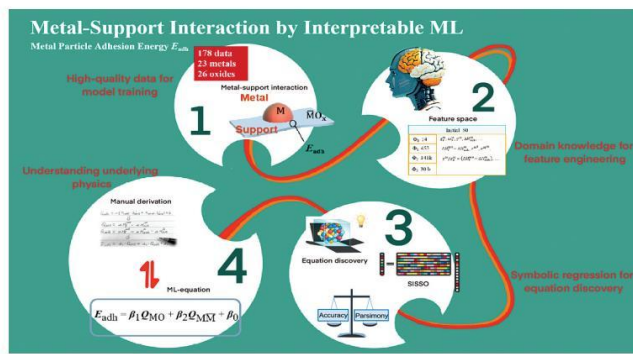
本报讯 中国科大李微雪教授课题组利用人工智能（AI）在催化基础研究取得重大突破。研究人员通过可解释AI技术从实验数据中建立了金属-载体相互作用与材料基本性质之间的控制方程，揭示了决定MSI的本质因素，提出了“强金属-金属作用原理性判据”，解决了氧化物载体包覆金属催化剂的难题。相关研究成果于11月22日发表在《科学》上。

如何开发高活性、高选择性和高稳定性的催化剂？其中的一个重大科学挑战是洞察“金属-载体相互作用”的本质及其调控，这一作用显著影响着催化剂的稳定性、电子转移、组分、形貌以及界面催化位等。

2021年，李微雪课题组建立了金属-载体相互作用调控催化剂稳定性的Sabatier原理，提出了通过构建相互作用强弱不同的双功能载体来解决催化剂在苛刻条件下的稳定性问题。然而，由于该作用敏感地依赖于金属和载体的组分、尺寸、形貌，催化剂制备和反应条件等，揭示决定金属-载体相互作用强弱的本质、发展具有预测能力的一般性理论仍是亟待解决的重大科学挑战。

在这一最新研究中，课题组人员借力AI技术展开了深入研究，为该问题的解决带来了新的突破口。他们汇总了多篇核心文献中的大量实验数据，通过可解释性AI算法，由材料性质作为基本特征，经过迭代式的数学操作，构建了一个高达300亿个表达式组成的特征空间。利用压缩感知算法，结合领域知识和理论推导，从中筛选出物理清晰、数值准确的描述符，成功建立了“金属-载体相互作用”与材料性质之间的控制方程。

该方程除了包含“金属-氧相互作用”外，还突破性地包含了“金属-金属相互作用”这一关键新变量，首次完整揭示了金属-载体相互作用的本质。研究发现，“金属-金



可解释性人工智能揭示“金属-载体相互作用”本质（郑明清 胡建红 制图）

属相互作用”是决定载体差异的关键因素，这为理解载体效应提供了全新视角。

大规模分子动力学模拟揭示，“金属-金属相互作用”还决定了氧化物包覆金属催化剂的动力学速率，以及包覆界面处金属-金属键的占比。基于此，团队提出了“强金属-金属作用原理性判据”，用以预测包覆现象的出现。这一判据不仅解释了迄今为止几乎所有观测到的氧化物包覆现象，还预测了更广泛的有待发现的新体系。

研究人员所提出的“金属-载体相互作用”理论具有极高的普适性。它不仅适用于氧化物负载的金属纳米催化剂，还适用于其负载的金属单原子分散催化剂，以及金属负载的氧化物薄膜催化剂。“强金属-金属作用原理性判据”，原则上也同样适用于其他金属化合物

载体的包覆行为。这一理论模型经过适当变换，可以推广到更一般的复合材料界面体系，为界面设计和调控提供理论指导。

清华大学化学系李亚栋院士评价：“这项成果解决了多相催化研究中的一个重大基础科学难题，对高效负载型催化剂的理性设计极具指导意义。”

李微雪表示，该成果有望加快新催化材料和新材料的发现，推动能源、环境和材料的绿色升级，助力社会的可持续发展。

令人振奋的是，研究人员在该研究中创新性地利用可解释性人工智能算法从实验数据中提炼出数学模型和科学原理，用来解决催化科学中的重大问题，这也为推动人工智能技术与化学研究的深度融合提供了全新视角。

（转自中国科学技术大学官方微信公众号）

科学家首次完成对火星空间太阳高能粒子事件的能谱构建

记者从中国科学院获悉，来自中国科学技术大学、中国科学院近代物理研究所、兰州空间技术物理研究所和德国基尔大学的科研人员利用高能粒子及辐射探测数据，结合火星大气粒子传输模拟，首次构建了火星空间完整的太阳高能粒子事件的能谱，这项研究对火星空间辐射环境的监测具有重要意义。相关成果近日发表在《国际空间科学期刊》（地球物理研究快报）上。

太阳高能粒子事件是由太阳爆发活动产生的最具破坏性的空间天气事件之一。事件发生期间，空间中的高能带电粒子会突然增强，可能对在轨航天器和航天员的安全造成巨大威胁。与地球不同，火星由于缺少磁场保护和大气层，其表面更易受到高能粒子的轰击，其在火星大气中生成的次级粒子的影响。研究太阳高能粒子事件对火星空间的影响，对未来火星探测任务中的防辐射工作具有重要意义。



图示：2022年2月15日太阳高能粒子事件同时被中国的天问一号轨道器（Tianwen-1）、欧洲航天局的微量气体轨道飞行器（TGO）、美国航空航天局的大火星大气和挥发物演化轨道器（MAVEN）以及火星表面的好奇号火星车（MSL）探测到。

本研究中，科研人员使用了多个探测器数据来构建相关谱能谱。中低能段的谱能谱由能量粒子分析仪和火星高能粒子仪提供。更高能段的谱能谱是团队结合火星表面的辐射评估探测器和火星大气传输模型模拟反演得到。研究团队通过对上述观测和反演的能谱进行拟合，得到了此次太阳高能粒子事件在火星空间1MeV–1000MeV能量范围内的完整谱能谱。

研究团队利用这一完整谱能谱计算了此次事件在火星轨道和火星表面引发的辐射剂量，得到的结果与轨道和表面实际测量值定量相符。这一结果验证了天问一号能量粒子分析仪数据的可靠性和火星辐射传输模型的准确性。该研究加深了人们对火星空间辐射环境的理解，为未来类似事件研究提供了参考，同时显示出在火星进行连续和协同辐射监测的必要性。

（转自央视新闻客户端2024年11月21日）

中国科大发现软晶格无机固体中的普拉托-瑞利不稳定性现象

本报讯 近日，中国科大俞书宏院士团队在一种银基硫属化合物（Ag₂E，E=S或Se）软晶格离子晶体中发现了类似于传统流体的普拉托-瑞利不稳定性现象，并以此建立了变表面能与界面能共同调控的自限制化学演化新方法。相关研究成果发表在《美国化学会志》上。

研究人员基于银基硫属离子晶体中的弱离子相互作用以及高阳离子迁移率特性，提出这类软晶格材料有望实现离子键的动态断裂与重组，从而作为一种“软粘性固体”表现类似于传统流体的普拉托-瑞利不稳定性行为。首先，研究人员使用离子交换方法在预先合成的CoS₂纳米线上包覆了一层亚纳米厚的Ag₂S壳层，形成了-CoS₂@Ag₂S-壳核形貌纳米线。随后，该纳米线在CoS₂壳层则在热力学驱动下自发地去润湿化，形成了-CoS₂@Ag₂S-CoS₂-周期性同轴异质纳米线。

研究人员进一步结合原位与非原位透射电子显微观测揭示了这一自限制演化过程，定量描述了其转动动力学，充分证明其符合固相相变不稳定性现象。此外，研究人员在Ag₂S壳层以及ZnS、ZnSe等不同纳米线材料上也观察到了类似的现象，证明了这一发现的普适性。这种高维复杂纳米线结构可作为优异的化学模板用于选择性集成更多功能性的纳米结构单元。为此，研究人员以-CoS₂@Ag₂S-CoS₂-周期性同轴异质纳米线为例进行展示，将其作为反应中间体，通过进一步的自限制演化，可控构筑了周期性异质纳米线材料。

亚稳态转变为热力学稳定态。而分子动力学模拟结果显示，相比于体相Ag₂S，亚纳米厚的Ag₂S薄层具有更高的离子扩散速率，从而保证了晶格的流动性。因此，在热力学与动力学共同影响下，这类软晶格无机固体表现出类似于传统流体的普拉托-瑞利不稳定性行为。

该工作拓展了无机固体中的瑞利不稳定性概念，为制备纳米颗粒以及具有明确结构、界面能和空间排列的高维周期性纳米结构提供了新思路，同时也为今后探索其软晶格特性（如钙钛矿等）中的类似行为与可调控演化提供了可能。

中国科大博士生邵振、江贤斌和张崇为论文共同第一作者，俞书宏院士、江慧军副教授和合肥工业大学李毅教授为论文通讯作者。（合肥微尺度物质科学国家研究中心 化学与材料科学学院 科研部）

本报讯 近日，中国科大物理学院、中国科学院强耦合量子材料物理重点实验室陈仙辉院士、王震宇教授与中国科学院物理研究所王志刚研究员、美国得克萨斯大学达拉斯分校吕兵教授合作，在拓扑物质的二维拓扑边界态研究中取得重要进展。相关研究成果于11月20日发表在《物理评论X》上。

研究团队结合扫描隧道显微镜和理论计算对α-Bi₂I₃单晶开展了系统的研究。该材料的原胞中存在两个α-Bi₂I₃原子层，它们之间通过中心反演相互联系。隧道谱测量发现在费米能附近存在较大的能隙，并在单原子层台阶处观测到了一维无能隙边界态的存在。该边界态在能隙内出现并随能量表现出近乎恒定的电子态密度分布，这是一维狄拉克色散的典型特征；同时，该边界态在空间上均匀且连续，对杂质缺陷并不敏感，支持了它们的拓扑保护属性。更重要的是，在所有的双原子层台阶处，高分辨率测量也确认了两个独立的一维边界态的存在，且它们的谱学特征与单原子层台阶几乎相同，并没有出现明显的耦合能隙，说明了该体系中一维拓扑边界态的鲁棒性。

研究团队的理论计算进一步表明，虽然α-Bi₂I₃具有平庸的拓扑对称指标（应被分类为平庸的绝缘体），但它具有非零的自旋陈数，因此对应一类新的拓扑物态——三维量子自旋霍尔绝缘体。这一概念利用自旋陈数对弱拓扑绝缘体和高阶拓扑绝缘体进行了推广：在三维量子自旋霍尔绝缘体中，三维布里渊区的每一个k₂平面都具有相同的非零自旋陈数，即空间上它由自旋陈数相同的二维量子自旋霍尔绝缘体堆叠而成，当层间耦合较弱（拓扑边缘态层间不耦合）时，每层均可贡献近量子化的自旋霍尔电导。

上述实验发现与理论计算表明，α-Bi₂I₃是一类具有自旋陈数描述的三维量子自旋霍尔绝缘体。该结果不仅拓宽了我们对三维绝缘体中拓扑特性的认识，也为实现鲁棒的二维拓扑边界态提供了一个理想材料平台。鉴于α-Bi₂I₃具有较大的能隙、无弱层间耦合的线性色散的拓扑边界态，它有望成为构建拓扑自旋器件和约拉纳器件的理想材料选择。

中国科大博士研究生喻水康、中国科学院物理所博士研究生邓俊泽和德州大学达拉斯分校博士研究生刘文豪为论文共同第一作者，王震宇教授、陈仙辉院士、王志刚研究员、吕兵教授为共同通讯作者。

（物理学院 中国科学院强耦合量子材料物理重点实验室 未来技术学院 科研部）

近日，中国科大教授刘琪与美国哈佛大学教授Marinka Zitnik 课题组合作，设计出一种深度生成算法PocketGen，用于生成与小分子结合的蛋白质口袋序列和空间结构。相关研究成果发表于《自然·机器智能》。

蛋白质口袋是蛋白质上适合与特定分子结合的空腔，每个蛋白质口袋都是一个特定的结合点。当小分子与蛋白质结合后，会引发蛋白质的构象变化，进而激活或者调节蛋白质的功能。要想设计蛋白质口袋，传统方法是能量优化和模板匹配，但该方法计算效率低、成功率低。现有的基于深度学习的模型又并非专为研究蛋白质-小分子相互作用而设计，可能无法充分描述蛋白质与小分子结合口袋区域之间的特征。

PocketGen则为上述问题的解决提供了新方案。该算法由双层图Transformer编码器和蛋白质预训练语言模型两部分组成。两者分别对应蛋白质骨架信息和序列信息。通过两个部分同时进行信息处理和不断迭代，该算法最终生成所需要的蛋白质口袋。

不仅如此，PocketGen在计算效率和蛋白质口袋设计的成功率方面表现亮眼，是目前全球最高效、具有最高成功率的蛋白质口袋设计算法之一。在实验中，PocketGen模型不仅在亲和力与结构合理性等指标上超过传统方法，计算效率方面也大幅提高——相比传统方法提高10倍以上。

据悉，PocketGen推进了深度生成模型用于功能蛋白质设计，为进一步理解蛋白质设计规律并开展生物实验验证奠定了基础，未来将在药物开发、生物传感器、酶催化等领域具有广泛的应用前景。

（转自《中国科学报》2024年11月20日01版）

科学家设计出一种高效蛋白质口袋生成算法